

NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT KHUẾCH TÁN CỦA HỢP KIM XEN KẼ AB VỚI CẤU TRÚC LẬP PHƯƠNG TÂM KHỐI

Nguyễn Quang Học¹, Đinh Quang Vinh¹, Lê Hồng Việt² và Nguyễn Văn Phương³

¹*Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội*

²*Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Sĩ quan Lục quân 1, Hà Nội*

³*Trường Trung học phổ thông Hoàng Hóa 2, Thanh Hóa*

Tóm tắt. Bài báo nghiên cứu lý thuyết khuếch tán của hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc lập phương tâm khối. Bằng phương pháp thống kê mômen chúng tôi đã rút ra các biểu thức giải tích của năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ, khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử xen kẽ, các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ, các đại lượng khuếch tán như tần số bước nhảy của nguyên tử xen kẽ, độ dài bước nhảy hiệu dụng, thừa số tương quan, hệ số khuếch tán và năng lượng kích hoạt cùng với phương trình trạng thái đối với hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc lập phương tâm khối dưới tác dụng của áp suất. Trong trường hợp khi nồng độ nguyên tử xen kẽ bằng không ta thu được lý thuyết khuếch tán của kim loại chính A.

Từ khóa: Hợp kim xen kẽ, tần số bước nhảy, độ dài bước nhảy hiệu dụng, thừa số tương quan, hệ số khuếch tán, năng lượng kích hoạt.

1. Mở đầu

Hợp kim nói chung và hợp kim xen kẽ (HKXX) nói riêng là những vật liệu phổ biến trong khoa học và công nghệ vật liệu. Việc nghiên cứu HKXX đã và đang thu hút sự quan tâm của nhiều nhà nghiên cứu [1-7].

Một trong các lý thuyết được sử dụng để nghiên cứu hợp kim là lý thuyết khuếch tán. Đối với hợp kim nói chung và HKXX nói riêng, có hai cơ chế khuếch tán cơ bản là cơ chế thay thế và cơ chế xen kẽ. Cơ chế nào là chủ đạo phụ thuộc vào từng kim loại và các tạp chất pha tạp.

Hai thông số cơ bản nhất cần được xác định khi nghiên cứu quá trình khuếch tán là năng lượng kích hoạt và hệ số khuếch tán. Có một số phương pháp lý thuyết để xác định các thông số này như mô hình Einstein, phương pháp tốc độ phản ứng, phương pháp động học nguyên tử,... Tuy nhiên, các phương pháp nói trên phần lớn chỉ mới giải quyết về mặt định tính và khi nghiên cứu định lượng gặp nhiều khó khăn về mặt toán học do phải thực hiện nhiều phép tính gần đúng đặc biệt là đối với các mô hình hợp kim như HKXX. Phương pháp thống kê mômen đã được áp dụng trong nghiên cứu tính chất cấu trúc, nhiệt động, đàn hồi, chuyển pha và khuếch tán của kim loại và hợp kim [8-10].

Hiện nay chưa có nhiều nghiên cứu định lượng về sự khuếch tán của hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc lập phương tâm khối. Bằng phương pháp thống kê mômen khi nghiên cứu sự khuếch tán của hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc lập phương tâm khối chúng tôi có thể rút ra được các biểu thức giải tích của năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ, khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử xen kẽ, các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ, các đại lượng khuếch tán như tần số bước nhảy của nguyên tử xen kẽ, độ dài bước nhảy hiệu dụng, thừa số tương quan, hệ số khuếch tán và năng lượng

Ngày nhận bài: 19/2/2016. Ngày nhận đăng: 20/3/2016.

Tác giả liên lạc: Nguyễn Quang Học, địa chỉ e-mail: hocnq@hnue.edu.vn

kích hoạt cùng với phương trình trạng thái đối với HKXK AB với cấu trúc lập phương tâm khối (LPTK) dưới tác dụng của áp suất.

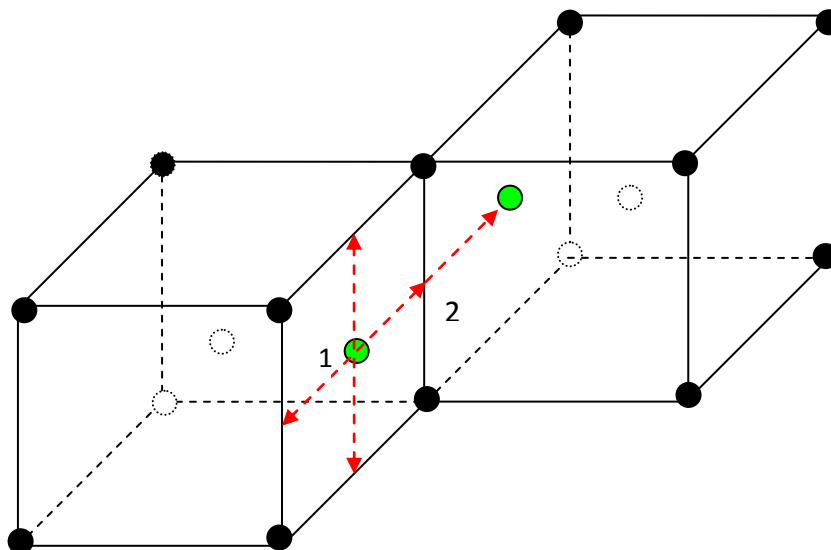
2. Nội dung nghiên cứu

2.1. Cơ chế khuếch tán trong hợp kim xen kẽ

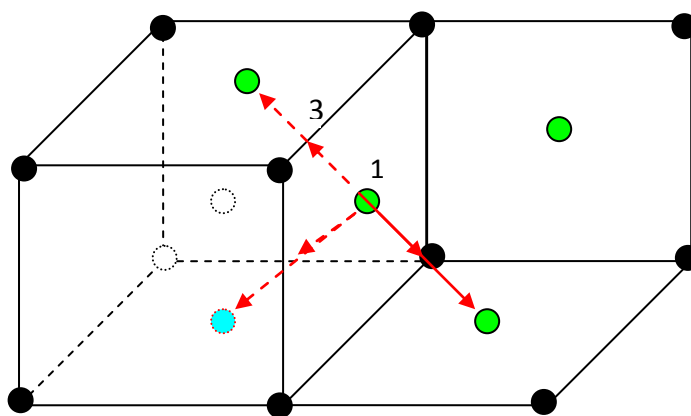
Trong mô hình HKXK AB với cấu trúc LPTK, các nguyên tử A có kích thước lớn nằm ở các đỉnh (nút mạng) và tâm khối, còn các nguyên tử xen kẽ B có kích thước nhỏ hơn nằm ở các tâm mặt. Trong mô hình này, có 2 cách để nguyên tử B dịch chuyển đến tâm của các mặt mạng bên cạnh. Theo cách I, nguyên tử B từ tâm mặt (vị trí 1) di chuyển qua điểm giữa cạnh ô mạng (vị trí 2) tới tâm mặt lân cận với khoảng cách a (a là chiều dài cạnh ô mạng). Theo cách này, có 4 vị trí mà nguyên tử B có thể dịch chuyển tới (Hình 1). Theo cách II, nguyên tử B từ tâm mặt (vị trí 1) di chuyển qua điểm giữa đoạn nối 2 tâm của 2 mặt mạng vuông góc với nhau của một ô mạng (vị trí 3) tới tâm mặt lân cận với khoảng cách $a/\sqrt{2}$ (vị trí 3). Theo cách này, có 8 vị trí mà nguyên tử B có thể dịch chuyển tới (Hình 2).

2.2. Năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ trong hợp kim xen kẽ

Năng lượng tự do của một nguyên tử xen kẽ B trong HKXK AB với cấu trúc LPTK đã được xác định bởi [9].



Hình 1. Cơ chế khuếch tán của mạng LPTK theo cách I



Hình 2. Cơ chế khuếch tán của mạng LPTK theo cách II

Nghiên cứu lý thuyết khuếch tán của hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc lập phương tâm khối

$$\begin{aligned} \psi \approx U_0 + 3\theta \left[x + \ln(1 - e^{-2x}) \right] + 3 \left\{ \frac{\theta^2}{k^2} \left[\gamma_2 x^2 cth^2 x - \frac{2\gamma_1}{3} \left(1 + \frac{xcth x}{2} \right) \right] \right. \\ \left. + \frac{2\theta^3}{k^4} \left[\frac{4}{3} \gamma_2^2 xcth x \left(1 + \frac{xcth x}{2} \right) - 2(\gamma_1^2 + 2\gamma_1\gamma_2) \left(1 + \frac{xcth x}{2} \right) (1 + xcth x) \right] \right\} \end{aligned} \quad (1)$$

trong phép gần đúng phi điều hòa hoặc

$$\psi = 3 \left\{ \frac{u_0}{6} + \theta \left[x + \ln(1 - e^{-2x}) \right] \right\}, U_0 = \frac{u_0}{2} \quad (2)$$

trong phép gần đúng điều hòa. Ở đây, $k_B = 1,38.10^{-23} \text{ J/K} = 1,38.10^{-16} \text{ erg/K}$ là hằng số Boltzmann,

$x = \frac{\hbar}{2k_B T} \sqrt{\frac{k}{m}}$, $\hbar = 1,055096.10^{-34} \text{ Js} = 1,055096.10^{-27} \text{ erg.s}$ là hằng số Planck và các đại lượng

$u_0, k, \gamma_1, \gamma_2$ được định nghĩa trong [9]. Như vậy, để tính năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ B ta cần phải xác định các đại lượng U_{0B} và k^B ở nhiệt độ T . Để làm điều đó, cần xác định các khoảng cách lân cận gần nhất $r_{1B}(0)$ và $r_{1B}(T)$ giữa 2 nguyên tử B trong HKXX ở áp suất không ở nhiệt độ 0 K và nhiệt độ T .

2.3. Khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử xen kẽ trong hợp kim

Có thể xác định khoảng cách lân cận gần nhất $r_{1B}(0,0)$ giữa 2 nguyên tử B trong HKXX ở áp suất không và ở nhiệt độ 0 K $r_{1B}(0,0)$ từ phương trình trạng thái hoặc từ điều kiện

$$\left(\frac{\partial U_{0B}}{\partial r_{1B}} \right)_{T=0K} = 0 \quad (3)$$

bằng cách giải phương trình nhờ phần mềm Maple, trong đó U_{0B} là năng lượng liên kết giữa nguyên tử xen B và các nguyên tử A của hợp kim. Sau khi tính được $r_{1B}(0,0)$, có thể xác định giá trị của các

đại lượng $k^B, \omega_B = \sqrt{\frac{k^B}{m_B}}, \gamma_B$ tại $r_{1B}(0,0)$ và từ đó xác định

$$x_B = \frac{\hbar\omega_B}{2k_B T}, a_{1B} = 1 + x_B cth x_B, a_{2B}, \dots, a_{6B}, A_B = a_{1B} + \sum_{i=2}^6 \left(\frac{\gamma_B k_B T}{k_B^2} \right)^i a_{iB}, y_{0B}(0, T) = \sqrt{\frac{2\gamma_B (k_B T)^2}{3k_B^3} A_B}.$$

ở áp suất không và nhiệt độ T [9]. Do đó, có thể xác định được khoảng cách lân cận gần nhất $r_{1B}(0, T)$ giữa 2 nguyên tử B trong HKXX ở áp suất không và nhiệt độ T theo công thức

$$r_{1B}(0, T) = r_{1B}(0, 0) + y_{0B}(0, T), \quad (4)$$

trong đó k^B, ω_B, γ_B được xác định ở áp suất không và nhiệt độ 0 K.

Trong trường hợp khi nguyên tử xen kẽ B khuếch tán theo cách II thì khi chuyển từ vị trí 1 sang vị trí 2, do các vị trí không gian giống nhau (số nguyên tử trên các quả cầu là như nhau) nên ta phải tính đến sự thay đổi không gian để tính $r_{2B}(0,0)$, nghĩa là

$$r_{2B}(0,0) = r_{2B}^*(0,0) + \Delta r_{2B}, \quad (5)$$

trong đó $r_{2B}^*(0,0)$ được xác định từ điều kiện cực tiểu năng lượng liên kết và Δr_{2B} là phần đặc trưng cho sự thay đổi năng lượng kích hoạt.

2.4. Các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ

Khi nguyên tử xen kẽ B ở vị trí 1 và trong phép gần đúng ba quả cầu phối vị [10].

$$U_{01B} = \varphi_{AB}(r_1) + 2\varphi_{AB}(r_1\sqrt{2}) + 4\varphi_{AB}(r_1\sqrt{5}), \quad (6)$$

$$k^{1B} = \varphi_{AB}^{(2)}(r_1) + \frac{4}{5}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{5}) + \frac{\sqrt{2}}{r_1}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{16\sqrt{5}}{25r_1}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{5}), \quad (7)$$

$$\gamma_{11B} = \frac{1}{24}\varphi_{AB}^{(4)}(r_1) + \frac{1}{8r_1^2}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{2}) - \frac{\sqrt{2}}{16r_1^3}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{2}), \quad (8)$$

$$\gamma_{21B} = \frac{1}{4r_1}\varphi_{AB}^{(3)}(r_1) + \frac{\sqrt{2}}{8r_1}\varphi_{AB}^{(3)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{1}{2r_1^3}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1) - \frac{1}{8r_1^2}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{2}) - \frac{1}{2r_1^3}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1) + \frac{\sqrt{2}}{16r_1^3}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{2}), \quad (9)$$

$$\gamma_{1B} = 4(\gamma_{11B} + \gamma_{21B}). \quad (10)$$

Khi nguyên tử xen kẽ B ở vị trí 2 và trong phép gần đúng ba quả cầu phối vị,

$$U_{02B} = \varphi_{AB}(r_1) + 2\varphi_{AB}(r_1\sqrt{2}) + 4\varphi_{AB}(r_1\sqrt{5}), \quad (11)$$

$$k^{2B} = \varphi_{AB}^{(2)}(r_1) + \frac{8}{5}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{5}) + \frac{1}{r_1}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1) + \frac{\sqrt{2}}{2r_1}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{12\sqrt{5}}{25r_1}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{5}), \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{12B} = & \frac{1}{48}\varphi_{AB}^{(4)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{\sqrt{2}}{16r_1}\varphi_{AB}^{(3)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{1}{8r_1^2}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1) \\ & - \frac{3}{32r_1^2}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{2}) - \frac{1}{8r_1^3}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1) + \frac{3\sqrt{2}}{64r_1^3}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{2}), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{22B} = & \frac{1}{8}\varphi_{AB}^{(4)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{1}{4r_1}\varphi_{AB}^{(3)}(r_1) - \frac{\sqrt{2}}{8r_1}\varphi_{AB}^{(3)}(r_1\sqrt{2}) + \frac{1}{2r_1^2}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1) \\ & + \frac{7}{16r_1^2}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{2}) - \frac{1}{2r_1^3}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1) - \frac{7\sqrt{2}}{32r_1^3}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{2}), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\gamma_{2B} = 4(\gamma_{12B} + \gamma_{22B}). \quad (15)$$

Khi nguyên tử xen kẽ B ở vị trí 3 và trong phép gần đúng ba quả cầu phối vị,

$$U_{03B} = \frac{1}{2}\varphi_{AB}(r_1) + \varphi_{AB}(r_1\sqrt{3}) + \varphi_{AB}(r_1\sqrt{5}), \quad (16)$$

$$\begin{aligned} k^{3B} = & \frac{1}{4}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1) + \frac{1}{6}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{3}) + \frac{1}{2}\varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{5}) \\ & + \frac{1}{4r_1}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1) + \frac{5\sqrt{3}}{18r_1}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{3}) + \frac{\sqrt{5}}{10r_1}\varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{5}), \end{aligned} \quad (17)$$

Nghiên cứu lý thuyết khuếch tán của hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc lập phương tâm khối

$$\begin{aligned} \gamma_{13B} = & \frac{1}{192} \varphi_{AB}^{(4)}(r_1) + \frac{1}{864} \varphi_{AB}^{(4)}(r_1\sqrt{3}) + \frac{1}{32r_1} \varphi_{AB}^{(3)}(r_1) - \frac{3}{64r_1^2} \varphi_{AB}^{(2)}(r_1) \\ & + \frac{11}{864r_1^2} \varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{3}) + \frac{3}{64r_1^3} \varphi_{AB}^{(1)}(r_1) - \frac{5\sqrt{3}}{864r_1^3} \varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{3}), \end{aligned} \quad (18)$$

$$\gamma_{23B} = \frac{1}{32} \varphi_{AB}^{(4)}(r_1) + \frac{1}{288} \varphi_{AB}^{(4)}(r_1\sqrt{3}) - \frac{1}{16r_1} \varphi_{AB}^{(3)}(r_1) + \frac{1}{48r_1} \varphi_{AB}^{(3)}(r_1\sqrt{3}) \quad (19)$$

$$\begin{aligned} & + \frac{7}{32r_1^2} \varphi_{AB}^{(2)}(r_1) + \frac{5}{288r_1^2} \varphi_{AB}^{(2)}(r_1\sqrt{3}) - \frac{7}{32r_1^3} \varphi_{AB}^{(1)}(r_1) - \frac{5\sqrt{3}}{864r_1^3} \varphi_{AB}^{(1)}(r_1\sqrt{3}), \\ & \gamma_{3B} = 4(\gamma_{13B} + \gamma_{23B}). \end{aligned} \quad (20)$$

Nếu biết thế tương tác $\varphi_{AA}, \varphi_{BB}$ thì có thể xác định thế tương tác φ_{AB} giữa 2 nguyên tử A và B trong HKXK AB như sau:

$$\varphi_{AB} \approx \frac{1}{2}(\varphi_{AA} + \varphi_{BB}). \quad (21)$$

2.5. Phương trình trạng thái của hợp kim xen kẽ

Coi khoảng cách lân cận gần nhất trung bình giữa 2 nguyên tử trong HKXK AB xấp xỉ bằng khoảng cách lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử trong kim loại sạch A (hoặc B).

Phương trình trạng thái của HKXK với cấu trúc LPTK ở nhiệt độ T được viết dưới dạng

$$Pv = -r_1 \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_0}{\partial r_1} + \theta_{xcthx} \frac{1}{2k} \frac{\partial k}{\partial r_1} \right), \quad (22)$$

trong đó $v = \frac{4r_1^3}{3\sqrt{3}}$ và sử dụng $\frac{\partial x}{\partial r_1} = \frac{x}{2k} \frac{\partial k}{\partial r_1}$. Có thể áp dụng tốt phương trình (22) nếu nhiệt độ T_0

được chọn để tính các thông số gần với nhiệt độ T . Ở 0 K, (22) có dạng

$$Pv = -r_1 \left(\frac{1}{6} \frac{\partial u_0}{\partial r_1} + \frac{\hbar\omega_0}{2k} \frac{\partial k}{\partial r_1} \right). \quad (23)$$

Nếu biết dạng của thế tương tác thì (23) cho phép xác định khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử trong hợp kim ở áp suất P và nhiệt độ 0 K.

Bằng cách làm tương tự, có thể xác định được các khoảng cách lân cận gần nhất $r_{1B}(P, 0)$ và $r_{1B}(P, T)$ giữa 2 nguyên tử xen kẽ, năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ ở áp suất P và nhiệt độ T và các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ ở các vị trí 1, 2 và 3 trong HKXK ở áp suất P và nhiệt độ 0 K.

2.6. Các đại lượng khuếch tán của hợp kim xen kẽ

Khi khuếch tán theo cơ chế xen kẽ, hệ số khuếch tán của HKXK có dạng

$$D = g\Gamma a^2, \quad (24)$$

trong đó Γ là tần số bước nhảy, a là độ dài bước nhảy hiệu dụng và g là một hệ số phụ thuộc vào cấu trúc tinh thể, nhiệt độ, cơ chế khuếch tán và được xác định bởi

$$g = n_1 f \quad (25)$$

với f là thừa số tương quan và n_1 là số vị trí gần nhất mà nguyên tử khuếch tán (nguyên tử xen kẽ) B có thể nhảy vào. Nếu các vị trí mà nguyên tử xen kẽ B có thể nhảy vào có xác suất như nhau thì $f = 1$. Do các vị trí gần mà nguyên tử xen kẽ B có thể nhảy vào có xác suất lớn hơn so với các vị trí xa nên $f < 1$ và gần đúng được xác định bởi công thức:

$$f \approx \left(1 - \frac{1}{n_1}\right)^2 \approx 1 - \frac{2}{n_1}. \quad (26)$$

Đối với mạng LPTK, nếu khuếch tán theo cách I, $n_1 = 4, f = 0,5$ và nếu khuếch tán theo cách II, $n_1 = 8, f = 0,75$.

Tần số bước nhảy của nguyên tử xen kẽ B được xác định bởi công thức

$$\Gamma = \frac{\omega}{2\pi} \exp\left(-\frac{\Delta\psi}{k_B T}\right), \omega = \sqrt{\frac{k^B}{m_B}}, \Delta\psi = \psi_B^* - \psi_B, \quad (27)$$

trong đó ψ_B^* là năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ B ở vị trí 1 và ψ_B là năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ B ở vị trí 2.

Độ dài bước nhảy hiệu dụng đối với mạng LPTK bằng

$$a = r_1 + r_2 \quad (28)$$

nếu khuếch tán và theo cách I

$$a = \frac{1}{2} \left(\frac{r_1}{\sqrt{2}} + r_2 \right) \quad (29)$$

nếu khuếch tán và theo cách II.

Hệ số khuếch tán có dạng

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right), \quad (30)$$

trong đó

$$D_0 = n_1 f a^2 \frac{\omega}{2\pi} \quad (31)$$

và

$$E = \Delta\psi \quad (32)$$

là năng lượng kích hoạt.

Khi nồng độ nguyên tử xen kẽ c_B thay đổi thì độ dài bước nhảy hiệu dụng a và hệ số trước hàm mũ D_0 thay đổi theo. Ta sử dụng các gần đúng sau:

$$r_B = c_A r_A^* + c_B r_B^* = (1 - c_B) r_A^* + c_B r_B^*, r_A^* = \frac{r_A}{\sqrt{2}} \quad (33)$$

trong đó c_A, c_B là các nồng độ của nguyên tử A và B, r_A là khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử A trong kim loại sạch, r_A^* là khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử A trong HKXK, r_B^* là khoảng lân cận gần nhất giữa nguyên tử B và các nguyên tử A trong HKXK, r_B là khoảng lân cận gần nhất giữa 2 nguyên tử B. Từ đó xác định r_{1B}, r_{2B}, r_{3B} tương ứng với các vị trí 1, 2 và 3 và các độ dài bước

nhảy hiệu dụng $a = r_{1B} + r_{2B}$ hoặc $a = \frac{1}{2} \left(\frac{r_{1B}}{\sqrt{2}} + r_{3B} \right)$. Sau đó tìm được sự phụ thuộc của D_0, D vào

nồng độ nguyên tử xen kẽ c_B .

Sau khi xác định khoảng cách lân cận gần nhất, năng lượng tự do, các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ ở các vị trí 1, 2, 3, có thể tìm được các đại lượng khuếch tán của HKXK như độ dài bước nhảy hiệu dụng, tần số bước nhảy, năng lượng kích hoạt, hệ số trước hàm mũ và hệ số khuếch tán. Trong trường hợp nồng độ nguyên tử xen kẽ bằng không, ta thu được lý thuyết khuếch tán của kim loại chính A [8].

3. Kết luận

Bằng phương pháp mômen thống kê, chúng tôi rút ra các biểu thức giải tích của năng lượng tự do của nguyên tử xen kẽ, khoảng cách lân cận gần nhất giữa hai nguyên tử xen kẽ, các thông số hợp kim đối với nguyên tử xen kẽ, các đại lượng khuếch tán như tần số bước nhảy của nguyên tử xen kẽ, độ dài bước nhảy hiệu dụng, thừa số trung quan, hệ số khuếch tán và năng lượng kích hoạt cùng với phương trình trạng thái đối với hợp kim xen kẽ AB với cấu trúc lập phương tâm khối phụ thuộc vào nhiệt độ và áp suất. Trong trường hợp nồng độ nguyên tử xen kẽ bằng không, ta thu được lý thuyết khuếch tán của kim loại sạch. Trong bài báo tiếp theo, chúng tôi áp dụng các kết quả lý thuyết thu được trong bài báo này để nghiên cứu sự khuếch tán của nguyên tử xen kẽ trong các hợp kim xen kẽ FeSi và FeH dưới tác dụng của áp suất.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] K. M. Zhao, G. Jiang, L. Wang, 2011. *Electronic and thermodynamic properties of B2-FeSi from first principles*. Physica **B406**, pp. 363-357.
- [2] W. Xiong, M. Selleby, Q. Chen, J. Odqvist, Y. Du, 2010. *Phase equilibria and thermodynamic properties in the Fe-Cr system*. Critical reviews in solid state and materials sciences **35**, pp. 125-152.
- [3] W. F. Smith, 1993. *Structure and properties of engineering alloys*. McGraw-Hill, Inc.
- [4] S. L. Chaplot, R. Mittal, N. Choudhury, 2010. *Thermodynamic properties of solids: experiment and modeling*. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co.KgaA.
- [5] Y. Fukai, 1993. *The metal-hydrogen system*. Springer. Berlin.
- [6] T. T. Lau, C. J. Först, X. Lin, J. D. Gale, S. Yip, K. J. Van Vliet, 2007. *Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys*. Phys. Rev. Lett. **98**. p. 215501.
- [7] L. S. I.Liyanage, S-G. Kim, J. Houze, S. Kim, M. A. Tschopp, M. I. Baskes, M. F.Horstemeyer, 2014. *Structural elastic and thermal properties of cementite (Fe₃C) calculated using a modified embedded atom method*. Phys. Rev. **B 89**, p. 094102.
- [8] Hoàng Văn Tịch, 2000. *Lý thuyết khuếch tán của tinh thể kim loại và hợp kim*. Luận án TS Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Hà Nội.
- [9] Vũ Văn Hùng, 2009. *Phương pháp thống kê mômen trong nghiên cứu tính chất nhiệt động và đàn hồi của tinh thể*. Nxb Đại học Sư phạm, Hà Nội.
- [10] Nguyen Quang Hoc, Dinh Quang Vinh, Bui Duc Tinh, Tran Thi Cam Loan, Ngo Lien Phuong, Tang Thi Hue, Dinh Thi Thanh Thuy, 2015. *Thermodynamic properties of binary interstitial alloys with a BCC structure: dependence on temperature and concentration of interstitial atoms*. Journal of Science of HNUE, Math. and Phys. Sci., **60**, 7, pp.146-155.

ABSTRACT

Diffusion of interstitial atoms in binary AB interstitial alloys with a BCC structure under pressure

The free energy of interstitial atoms, the nearest neighbor distance between two interstitial atoms, the alloy parameters for interstitial atoms, the diffusion quantities for the jumping frequency of interstitial atom, the effective jumping length, the correlation factor, the diffusion factor and the activated energy and the equation of state for AB binary interstitial alloy with a BCC structure under pressure were derived using the statistical moment method. When the concentration of interstitial atoms is equal to zero, we obtain the diffusion theory of main metal A.

Keywords: Interstitial alloy, jumping frequency, effective jumping length, correlation factor, diffusion factor, activated energy.